量子固体の動的記述II : 交換相互作用

AUTHOR(S):

生井沢, 寛

量子固体の動的記述 II

－交換相互作用－

成蹊大工学部　生 井 沢　寛

（６月１９日受理）

§ 1.　序

前稿Ｉ[1]において，古典的格子力学の通用しない量子固体における音波の理論を与えた。音波の分散関係を得るに当って，並進対称性に加え，２体Ｋ行列によるセルフコンシステントな記述[2),3)]が重要な役割を果した。この際用いられた近似的ハミルトニアンは，周期的な外場及び２体相互作用のうちで，原子の格子点位置を移動もしくは交換させる項が省略し得るものとして求められた。この仮定は古典的格子力学においては，当然の事として前提されている。しかしながら，量子固体においては事情はそれ程単純ではない。Ｉにも詳述したように，量子固体中では原子は零点振動によって大きな広がりを持つ。２原子間力のハードコアの影響で，広がりは大きくても，原子間の波動函数の重なりは抑えられている事が判っている。この為前述の仮定が良く満されている。しかし，波動函数の重なりが全く無い訳ではないから，小さいとはいえ有限の交換積分が存在するであろう。この量子固体での交換効果は，バンド運動を行う電子が交換の主役を演ずる磁性体などの通常の固体に対比されよう。前者においては，零点振動で大きく広がった原子そのものが交換するのである。交換効果についての興味は，このアカデミックな対比に止まらない。もしも，有限な交換積分があれば，核スピン１／２を有する ^3He の固体において，充分低温で，交換積分の符号に応じた磁性を観測する事が出来よう。実際，交換積分の大いさが数ｍＫ程度の弱い反強磁性体である事が，固体 ^3He についてほぼ確実となっている。[4)]

実際的にも興味深いので，この論文では量子固体における交換相互作用の問題を理論的に扱う。ここでは，量子固体の基底エネルギー問題[2),3)]及び音波の問題[1)]の定式化の基礎となった，岩本＝生井沢の描像にもとづいて議論を進める。原子の広がりは大きいが，２原子間力のハードコアの反撥で，実質

的な原子間の波の重なりは抑えられているという事実を踏えて，交換は小さく，1体原子は依然として充分良く局在化しているものと仮定する。そこで，Iでの様に全ハミルトニアンを分類し，そこで音波の取扱いの出発となった局在化近似ハミルトニアン$\mathscr{H}$に，交換項，そして格子点移動項を逐次摂動項として加えて行ったハミルトニアンの基底エネルギーを求める。第2章において，交換項まで含めたハミルトニアンを扱う。交換項がある為，原子の統計を無視していたIN－2の方法を改良して，そこでの2体方程式を，原子の入れ換え対称性を考慮して解く。この解より，IN－2に従って，2種の入れ換え対称性に対応する2個のK行列を導入し，初めの2体相互作用vをKで展開する。セルフコンシステンシイの要請により，外場Uは，原子の統計に応じて，Kにより定められる。全ハミルトニアンの基底エネルギーは，K行列により展開される。特に興味のある^3H_eの場合について，スピン依存項をベクトル模型の形にまとめる事は容易であり，交換積分のKによる表現が得られる。ところで，IN－2にも強調された様に，異る2体方程式を採る事により，異る摂道展開が可能である。ここでは，例として，IN－2で扱われたもうひとつの定式化を，原子の統計を取入れた場合に拡張し，それによる摂動展開を与え，交換力を求めて，初めの方法と比較しよう。

第3章では，交換相互作用に加え，更に格子点移動項まで含めたハミルトニアンに従う系を考える。この際，1体場Uによる局在化が良いという仮定の為に，新しい縮退が出現する。実際，相互作用のない場合の2原子基底状態（エネルギー$2\epsilon_0$）は，局在化が良いなら，2つの原子が各々1体基底状態（エネルギーϵ_0）にあって，可能なすべての格子対に収まっている状態である。この縮退及び，原子の統計を正しく反映して2体問題が解けたとすれば，有効相互作用（$\widetilde{K}$行列と呼ぼう）を導入して，議論を第2章に平行して進める事が出来る。この$\widetilde{K}$行列によってもとの2体力vをあらわし，統計に応じて外場Uを定めて，全ハミルトニアンの基底エネルギーを求めればよい。この方法は，固体内で原子がバンド運動をするという描像と，原子は各格子点に堅く局在化されているという描像の中間に位置するものと言えよう。

第4章には，以上の定式化に対する数値的解析の為の注意を与える。

§ 2. 交換相互作用

この章では，交換相互作用を含めた全ハミルトニアン

$$\mathscr{H} \cong \mathscr{H}'' = \mathscr{H}_0^{(a)} + \mathscr{H}_I^{(ad)} + \mathscr{H}_I^{(ae)} \qquad (2.1)$$

の基底エネルギーを求める。右辺の第2項までは，I及びIN－2で扱った局在化ハミルトニアン$\mathscr{H}'$であり，最後の項は交換項である（Iを見よ）；

$$\mathscr{H}_0^{(a)} = \sum_i \sum_m \varepsilon_m b_m(\vec{R}_i)^+ b_m(\vec{R}_i) \quad , \qquad (2.2)$$

$$\mathscr{H}_I^{(ad)} = -\sum_i \sum_{m,n} U(n\vec{R}_i\,;m\vec{R}_i)\, b_n(\vec{R}_i)^+ b_m(\vec{R}_i)$$
$$+\frac{1}{2}\sum_{i\neq j}\sum_{m_1 m_2 n_1 n_2} v(n_1\vec{R}_i\, n_2\vec{R}_j\,; m_1\vec{R}_i\, m_2\vec{R}_j)$$
$$\times b_{n_1}(\vec{R}_i)^+ b_{n_2}(\vec{R}_j)^+ b_{m_2}(\vec{R}_j)\, b_{m_1}(\vec{R}_i)\,,$$
$$(2.3)$$

及び

$$\mathscr{H}_I^{(ae)} = (\pm)\frac{1}{2}\sum_{i\neq j}\sum_{m_1 m_2 n_1 n_2} v(n_2\vec{R}_j\, n_1\vec{R}_i\,; m_1\vec{R}_i\, m_2\vec{R}_j)$$
$$\times b_{n_1}(\vec{R}_i)^+ b_{n_2}(\vec{R}_j)^+ b_{m_2}(\vec{R}_j)\, b_{m_1}(\vec{R}_i)\ .$$
$$(2.4)$$

交換項 $\mathscr{H}_I^{(ae)}$ の符号は，ボーズ統計の場合に＋，フェルミ統計の場合に－である。原子の統計を無視したIN－2の方法を，統計を考慮した場合に拡張しよう。Iと同様に1体場のワニエ表現$w_m(\vec{r}-\vec{R}_i)$が，1体ハミルトニアンH($\vec{r}$)の良い近似の固有状態であると仮定する：

$$H(\vec{r})w_m(\vec{r}-\vec{R}_i) = (\vec{p}^2/2m+U(\vec{r}))\,w\ (\vec{r}-\vec{R}_i)$$
$$= \varepsilon_m w_m(\vec{r}-\vec{R}_i) \qquad (2.5)$$

相互作用の無い時の２原子状態を決めよう。２体ハミルトニアン

$$\overline{H}(\vec{r}, \vec{r}') = H(\vec{r}) + H(\vec{r}'), \qquad (2.6)$$

は，粒子の入れ換え演算子Ｐと可換だから，ＨとＰの同時固有状態を採る：

$$\langle \vec{r}, \vec{r}' \mid m\vec{R}_i\, n\vec{R}_j\,; \pm\rangle$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2}}\{w_m(\vec{r}-\vec{R}_i)\, w_n(\vec{r}'-\vec{R}_j) \pm w_n(\vec{r}'-\vec{R}_j)\, w_m(\vec{r}-\vec{R}_i)\},$$

$$(i > j). \qquad (2.7)$$

明らかに

$$\overline{H} \mid m\vec{R}_i\, n\vec{R}_j\,; s\rangle = \varepsilon(mn) \mid m\vec{R}_i\, n\vec{R}_j\,; s\rangle, \qquad (2.8)$$

及び

$$P \mid m\vec{R}_i\, n\vec{R}_j\,; s\rangle = (s) \mid m\vec{R}_i\, n\vec{R}_j\,; s\rangle. \qquad (2.9)$$

ここに，$s=\pm$，は，Ｐの固有値である。この２体状態は次の直交関係をみたす；

$$\langle m'\vec{R}_{i'}\, n'\vec{R}_{j'}\,; s' \mid m\vec{R}_i\, n\vec{R}_j\,; s\rangle$$

$$= \delta_{ss'}\, \delta_{\vec{R}_i \vec{R}_{i'}}\, \delta_{\vec{R}_j \vec{R}_{j'}}\, \delta_{mm'}\, \delta_{nn'}, \quad (i > j,\ i' > j'). \qquad (2.10)$$

次に我々は，Ｉ Ｎ－２に従って，２体方程式

$$[\overline{H}(\vec{r}, \vec{r}') + v(\vec{r}-\vec{r}')]\, \Psi(\vec{r}, \vec{r}') = e\Psi(\vec{r}, \vec{r}'), \qquad (2.11)$$

の基底状態を考えよう。２体力 $v(\vec{r}-\vec{r}')$ は，$|\vec{r}-\vec{r}'|$ のみに依るから，２体ハミルトニアン

$$H(\vec{r},\vec{r}')=\overline{H}(\vec{r},\vec{r}')+v(\vec{r}-\vec{r}') \quad , \qquad (2.12)$$

もPと可換である。従って$\Psi(\vec{r},\vec{r}')$も同時にPの固有状態とし得る：

$$P\Psi^{(\pm)}=(\pm)\Psi^{(\pm)} \ . \qquad (2.13)$$

全ハミルトニアン，$\mathcal{H}''$に従う系においては，$\mathcal{H}'$によって格子に配列された原子が，交換相互作用によって，互いの位置を交換し得るが，原子対がもとの格子点の対から，別の対に移ってしまうことはない。そこで，2体方程式（2．11）を解く際に，2つの格子点（$\vec{R}_i$，$\vec{R}_j$，$i \neq j$）に置かれた2原子が，別の格子点対に移る事はないとして良い。原子の入れ換え対称性を考慮すれば，その様な解は，次で与えられる

$$\psi(\pm)_{ij}=\Omega(\pm)_{ij}\,|\,0\vec{R}_i\;0\vec{R}_j\,;\pm\rangle , \qquad (2.14)$$

ここに，$\Omega(\pm)_{ij}$ は波動行列，

$$\Omega^{(\pm)}_{ij}=1+(e^{(\pm)}-\overline{H})^{-1}Q^{(\pm)}_{ij}v\Omega(\pm)_{ij}, \qquad (2.15)$$

また，$(1-Q^{(\pm)}_{ij})$は，自由な2体基底状態への射影演算子

$$Q^{(\pm)}_{ij}=1-|\,0\vec{R}_i\;0\vec{R}_j\,;\pm\rangle\langle 0\vec{R}_i\;0\vec{R}_j\,;\pm| . \qquad (2.16)$$

上において，相互作用vが加わって，縮退していた自由な2体基底状態は，エネルギーが$e^{(\pm)}$の，2つの状態に分かれる：

$$H(\vec{r},\vec{r}')\psi^{(\pm)}_{ij}(\vec{r},\vec{r}')=e^{(\pm)}_{ij}\psi^{(\pm)}_{ij}(\vec{r},\vec{r}') . \qquad (2.17)$$

規格化と直交性は次の通り：

$$\langle 0\vec{R}_{i'}, 0\vec{R}_{j'}; s'\,|\,\psi(s)_{ij}\rangle=\langle 0\vec{R}_{i'}\; 0\vec{R}_{j'}; s'\,|\,\Omega^{(\pm)}_{ij}\,|\,0\vec{R}_i\;0\vec{R}_j\,;s\rangle$$
$$=\delta_{ss'}\,\delta_{\vec{R}_i\vec{R}_{i'}}\,\delta_{\vec{R}_j\vec{R}_{j'}} . \qquad (2.18)$$

K 行列は次で定める：

$$K_{ij}=K^{(+)}{}_{ij}P^{(+)}+K^{(-)}{}_{ij}P^{(-)}, \qquad (2.19)$$

ここに

$$K^{(\pm)}{}_{ij}=v\cdot\Omega^{(\pm)}{}_{ij}, \qquad (2.20)$$

$$P^{(\pm)}=\frac{1}{2}(1\pm P). \qquad (2.21)$$

この行列が，v の持っていた様なハードコア的特異性をもたない事は，I N－2に示したと同様に示す事が出来る。K 行列は，(2. 15)から，次をみたす：

$$K^{(\pm)}{}_{ij}=v+v\,(e^{(\pm)}{}_{ij}-\overline{H})^{-1}\,Q^{(\pm)}{}_{ij}K^{(\pm)}{}_{ij}\ . \qquad (2.22)$$

この方程式では，格子対 ($\vec{R}_i$, $\vec{R}_j$) は固定されている。他の対では，対応するK 行列が，同様の方程式をみたす。さて，直交規格化と，K の定義とから (i , j は略)

$$\Delta e^{(\pm)}\equiv e^{(\pm)}-\epsilon(00)=K^{(\pm)}(00;00), \qquad (2.23)$$

に注意すれば，(2. 22)を，v について解く事が出来る：

$$v=v^{(+)}P^{(+)}+v^{(-)}P^{(-)}, \qquad (2.24)$$

ただし

$$v^{(\pm)}=K^{(\pm)}-K^{(\pm)}G^{(\pm)}K^{(\pm)}+\Delta e^{(\pm)}K^{(\pm)}G^{(\pm)2}K^{(\pm)}$$
$$+K^{(\pm)}G^{(\pm)}K^{(\pm)}G^{(\pm)}K^{(\pm)}+\cdots, \qquad (2.25)$$

ここに，

$$G^{(\pm)}=(\epsilon(00)-\overline{H})^{-1}Q^{(\pm)} \qquad (2.26)$$

次には，外場Uを，K行列によって定めよう。このUの表現を，1体方程式（2．5）及び2体方程式（2．11）と組み合わせることにより，ひとつのセルフコンシステントな系が作られる。この系を解いてKを求めれば，全ハミルトニアン$\mathcal{H}''$の基底エネルギーを，Kで摂動展開する事はやさしい。統計による違いを考慮して，2つの場合に分けて考えよう－

a）原子スピン0の場合（^4H_e）：

外場Uは

$$U_i(n;m)=\sum_{j(\neq i)}\{K(n\vec{R}_i\,0\vec{R}_j;m\vec{R}_i\,0\vec{R}_j)+K(0\vec{R}_j\,n\vec{R}_i;m\vec{R}_i\,0\vec{R}_j)\}$$

$$=\sum_{j(\neq i)}K^{(+)}_{ij}(n0;m0)\,, \qquad (2.27)$$

で与えられる。この時，無摂動ハミルトニアンを$\mathcal{H}^{(a)}_0$にとり，その基底状態

$$\left.\begin{aligned}\Phi_0&=\prod_{i=1}^{N}w_0(\vec{r}_i-\vec{R}_i)\\ \mathcal{H}^{(a)}_0\Phi_0&=\epsilon_0\Phi_0=(N\epsilon_0)\Phi_0\end{aligned}\right\} \qquad (2.28)$$

から出発し，vの展開（2．25）と，Uの定義とを用いて，$\mathcal{H}''$の基底エネルギーをKで摂動展開しよう。その結果は，入れかえ演算に対して対称な場合のK行列，$K^{(+)}$のみがあらわれて，IN－2の結果を$K^{(+)}$で書き下したものと全く同様となる。

b）原子スピン1／2の場合（^3H_e）：

各原子のスピンの第3成分$\mu=\pm1/2$を陽に書けば，外場は

$$U_i(n\mu';m\mu)=\frac{1}{2}\sum_{j(\neq i)}\sum_{\mu_1}\{K(n\mu'\vec{R}_i\,0\mu_1\vec{R}_j;m\mu\vec{R}_i\,0\mu_1\vec{R}_j)-K(0\mu_1\vec{R}_j\,n\mu'\vec{R}_i;m\mu\vec{R}_i\,0\mu_1\vec{R}_j)\}\,,$$

$$(2.29)$$

で与えられる。スピン自由度まで含めた自由な２体状態を，前と同様に決めよう。軌道部分とスピン部分を分けて書くと

$$
\left.
\begin{aligned}
|m\mu\vec{R}_i\, n\mu'\vec{R}_j\,;+\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}\{\,|m\vec{R}_i\, n\vec{R}_j\,;+\rangle|\mu\mu'\,;+\rangle \\
&\quad + |m\vec{R}_i\, n\vec{R}_j\,;-\rangle|\mu\mu'\,;-\rangle\} \\
|m\mu\vec{R}_i\, n\mu'\vec{R}_j\,;-\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}\{\,|m\vec{R}_i\, n\vec{R}_j\,;+\rangle|\mu\mu'\,;-\rangle \\
&\quad + |m\vec{R}_i\, n\vec{R}_j\,;-\rangle|\mu\mu'\,;+\rangle\}
\end{aligned}
\right\} \qquad (2.30)
$$

ここに，対称化されたスピン状態

$$
|\mu\mu'\,;\pm\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\{\,|\mu\rangle|\mu'\rangle \pm |\mu'\rangle|\mu\rangle\}, \qquad (2.31)
$$

は，次の様に直交化されている：

$$
\langle \mu'_1\mu'_2\,;s'|\mu_1\,\mu_2\,;s\rangle = \delta_{ss'}\{\delta_{\mu_1\mu_1'}\delta_{\mu_2\mu_2'} + (s)\delta_{\mu_1\mu_2'}\delta_{\mu_2\mu_1'}\}. \qquad (2.32)
$$

これらによってUを書き換えよう；

$$
U_i\,(n\mu'\,;m\mu) = \delta_{\mu\mu'}\sum_{j(\neq i)}(K^{(+)}_{ij}\,(n0\,;m0) + 3K^{(-)}_{ij}\,(n0\,;m0))/4. \qquad (2.33)
$$

上で，和の各項が，反平行スピン及び平行スピンの場合の平均になっている事に注意しよう。

無摂動ハミルトニアン$\mathcal{H}^{(a)}_0$の基底状態は

$$
\Phi_{\{\mu\}}(\vec{r}_1,\vec{r}_2,\cdot\cdot,\vec{r}_N) = (N!)^{-1/2}\sum_{(i_1 i_2,\cdot\cdot i_N)}
$$

$$\times \ \mathrm{sign}(i_1 i_2, \cdots i_N) \langle \vec{r}_1 | 0\mu_{i_1} \vec{R}_{i_1} \rangle$$

$$\times \langle \vec{r}_2 | 0\mu_{i_2} \vec{R}_{i_2} \rangle \cdots \langle \vec{r}_N | 0\mu_{i_N} \vec{R}_{i_N} \rangle$$

$$\mathscr{H}_0^{(a)} \Phi_{\{\mu\}} = \varepsilon_0 \Phi_{\{\mu\}} \tag{2.34}$$

ここに，$\{\mu\}$ は，スピンの組

$$\{\mu\} \equiv \{\mu_1, \mu_2, \cdots\cdots, \mu_N\}, \ \mu_i = \pm 1/2, \tag{2.35}$$

とする。この基底状態をもとにして，$\mathscr{H}''$ の基底エネルギー$E''\{\mu\}$をK行列で展開する事はたやすい。例えばKの1次までで

$$E''\{\mu\} - \varepsilon_0 = E^{(1)}_{\{\mu\}},$$

とすると，

$$\begin{aligned} E^{(1)}_{\{\mu\}} = -\sum_{i \neq j} \{ & (1+\delta_{\mu_i \mu_j})/2 \cdot [K^{(+)}_{ij}(00;00) \\ & + K^{(-)}_{ij}(00;00)]/4 + (1-\delta_{\mu_i \mu_j})/2 \cdot \\ & \times [-K^{(+)}_{ij}(00;00) + 3K^{(-)}_{ij}(00;00)]/4 \}. \end{aligned} \tag{2.36}$$

この表現を通常のベクトル模型の形に書き換えよう。今パウリスピンを$\vec{\sigma}$とし，2原子系の全スピンSの状態への射影演算子をΠ_S（S＝0, 1）とすれば，

$$\begin{aligned} \Pi_1 &= (3 + \vec{\sigma}_i \vec{\sigma}_j)/4 \\ \Pi_0 &= (1 - \vec{\sigma}_i \vec{\sigma}_j)/4 \end{aligned} \tag{2.37}$$

この時次が成立つ：

$$\left.\begin{aligned} &\langle\mu_i\,\mu_j\,|\,\Pi_1\,|\,\mu_i\,\mu_j\rangle=(1+\delta_{\mu_i\,\mu_j})/2 \\ &\langle\mu_i\,\mu_j\,|\,\Pi_0\,|\,\mu_i\,\mu_j\rangle=(1-\delta_{\mu_i\,\mu_j})/2 \end{aligned}\right\} \quad (2.38)$$

これより $E^{(1)}_{\{\mu\}}$ は次の様になる：

$$E^{(1)}_{\{\mu\}}=E^{(1)}_d+E^{(1)}_e, \quad (2.39)$$

ここに，$E^{(1)}_d$ 及び $E^{(1)}_e$ は，夫々O（K）での，体積エネルギー及び交換エネルギーであり

$$E^{(1)}_d=-(1/2)\sum_{i\neq j}(K^{(+)}_{ij}(00;00)+3K^{(-)}_{ij}(00;00))/4, \quad (2.40)$$

及び

$$E^{(1)}_e=-(1/2)\sum_{i\neq j}\langle\mu_i\mu_j\,|\,(\vec{\sigma}_i/2)\cdot(\vec{\sigma}_j/2)\,|\,\mu_i\mu_j\rangle\, J^{(1)}_{ij}, \quad (2.41)$$

で与えられる。ただし，$J^{(1)}_{ij}$ はO（K）での交換積分である：

$$\begin{aligned} J^{(1)}_{ij}&=K^{(+)}_{ij}(00;00)-K^{(-)}_{ij}(00;00) \\ &=2K_{ij}(0\vec{R}_j\,0\vec{R}_i\,;0\vec{R}_i\,0\vec{R}_j)=e^{(+)}_{ij}-e^{(-)}_{ij}. \end{aligned} \quad (2.42)$$

入れ換え対称性による差が無視され得る場合

$$(e^{(+)}+e^{(-)})/2\gg|e^{(+)}-e^{(-)}|/2,$$

には，上は夫々，(±) の差を無視して，

$$E^{(1)}_d\approx-(1/2)\sum_{i\neq j}K_{ij}(00;00)$$

及び

$$E^{(1)}{}_{e} \approx 0$$

となる。これはＩＮ－２の結果に対応する。

以上で，原子の統計を考慮して全ハミルトニアン$\mathcal{H}''$の基底エネルギーを２体有効相互作用－Ｋ行列－で展開するセルフコンシステントな方法が与えられた。しかしながら，ＩＮ－２に明らかにされたように，異る２体方程式から出発し異る有効相互作用を展開パラメーターとして採る事によって，異る摂動展開を実行する事が出来る。この任意性は，原子の統計を考慮する場合でも変らない。そこで，例として，ＩＮ－２に述べられたＬ行列による定式化を，統計を考えた場合に拡張してみよう。２体方程式は次とする；

$$[\bar{H}(\vec{r},\vec{r}\,')+v'(\vec{r}-\vec{r}\,')]\psi(\vec{r},\vec{r}\,')=e\psi(\vec{r},\vec{r}\,'), \qquad (2.43)$$

ここに，ｖ′は，前述の２体方程式（２．１１）で数え過ぎていた相互作用項を，もとのｖから差し引いた新しい相互作用とする。差し引き項は外場Ｕを定めればただちに求まる。前と同様に，入れ換え対称性を考慮して新しい２体方程式を解き，有効相互作用－$L^{(\pm)}$行列－を定める。Ｌ行列により新しい相互作用ｖ′を展開し，統計に応じて外場Ｕを定め，全ハミルトニアン$\mathcal{H}''$の基底エネルギーの$L^{(\pm)}$による摂動展開を行う。結果は，原子スピン０（^{4}He）に対しては，ＩＮ－２のＬ行列展開を$L^{(+)}$でおきかえたものに同じとなる。スピン１／２（^{3}He）の場合には，ｏ（Ｌ）までの展開で，ｂ）の$K^{(\pm)}$による表現を，そのまま$L^{(\pm)}$の表現としたものが得られる（高次は異る）。特に交換積分に対しては，

$$J^{(1)}{}_{ij}=L^{(+)}{}_{ij}(00;00)-L^{(-)}{}_{ij}(00;00), \qquad (2.44)$$

を与える。

これら２つの方法の差は，２体方程式（２．１１）と（２．４３）における，

相互作用の数え過ぎの有無，言い換えれば，数え過ぎの差し引き項の有無による外場の差である（図１）．第１の方法では，各原子は外場により各格子点に局在化されていて相互作用を行う（図１ａ）が，第２の方法では，前者に存在した外場のカベが取除かれた場の中において相互作用を行う。

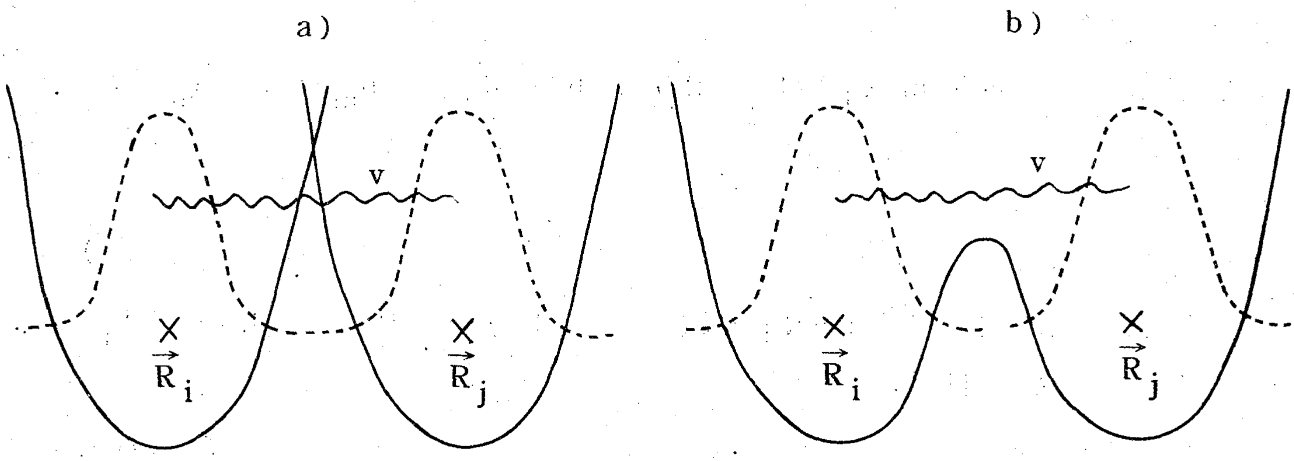


図 1.　実線は外場を，点線は１体波動函数を，波線は相互作用 v を示す

直観的には第２の方法の方が，原子の交換を容易にする様に見える。勿論，基底エネルギーの摂動展開を充分高次まで採れば，いずれの方法でも同じ交換積分を与えるはずである。両者の比較は，凝集エネルギーの値及び交換積分の実験値を，いずれの方法が低次の摂動展開で速かに説明しうるかによって行う事が出来よう。

§ 3.　格子点移動を含める場合への拡張

前章では，交換はあっても，原子の局在化は充分良く，原子対は位置を互換し得るのみで，別の格子点対に飛び移ってしまう事は無いとした。ここでは，この仮定に止まらず，我々の描像が更に，格子点移動を伴う場合にも拡張し得る事を示そう。

解くべき全ハミルトニアンは次である：

$$\mathcal{H} \cong \mathcal{H}''' \equiv \mathcal{H}'' + \mathcal{H}_{\mathrm{I}}^{(b)} , \qquad (3.\ 1)$$

ここに，$\mathscr{H}_{I}^{(b)}$ は格子点移動相互作用

$$\mathscr{H}_{I}^{(b)}=-\sum_{i\neq j}\sum_{mn}U(n\vec{R}_j;m\vec{R}_i)b_n(\vec{R}_j)^{+}b_m(\vec{R}_i)$$

$$+(1/2)\sum_{(i,j)\neq(i',j')}\sum_{m_1m_2n_1n_2}v(n_1\vec{R}_{i'}n_2\vec{R}_{j'};$$

$$m_1\vec{R}_i m_2\vec{R}_j)\times b_{n_1}(\vec{R}_{i'})^{+}b_{n_1}(\vec{R}_{j'})^{+}b_{m_2}(\vec{R}_j)b_{m_1}(\vec{R}_i).$$

（３．２）

格子点移動項 $U(n\vec{R}_j;m\vec{R}_i)$ 及び $v(n_1\vec{R}_{i'}\ n_2\vec{R}_j;m_1\vec{R}_i m_2\vec{R}_j)$ を，２原子間の有効相互作用と関係付けなくてはならない。解くべき２体方程式は，前章の第１の方法で用いた（２．１１）であるとしよう。ワニエ波を $H(\vec{r})$ の良い固有状態であるとした為に，自由な２原子基底状態（エネルギー $2\varepsilon_0$）は，入れ換え対称性まで含め，$N(N-1)$ 重に縮退している事に注意しよう。それらの重ね合わせを出発にとろう：

$$|00;\pm\rangle=\sum_{i>j}c_{ij}^{(\pm)}|0\vec{R}_i0\vec{R}_j;\pm\rangle,\qquad(3.3)$$

ただし規格化は，

$$\langle 00;\pm|00;\pm\rangle=1\quad\text{or}\quad\sum_{i>j}|c_{ij}^{(\pm)}|^2=1,$$

（３．４）

である。波動行列 $\widetilde{\Omega}$ 及び有効相互作用 $\widetilde{K}$ は，次で定める：

$$\psi^{(\pm)}=\widetilde{\Omega}^{(\pm)}|00;\pm\rangle$$

$$=[1+(e^{(\pm)}-\bar{H})^{-1}\widetilde{Q}^{(\pm)}v\widetilde{\Omega}^{(\pm)}]|00;\pm\rangle,\qquad(3.5)$$

及び

$$\widetilde{K}^{(\pm)}=v\Omega^{(\pm)}=v+v(e^{(\pm)}-\bar{H})^{-1}\widetilde{Q}^{(\pm)}\widetilde{K}^{(\pm)}.$$

（３．６）

ここに，$\psi^{(\pm)}$は（2．11）の解であり，また

$$\widetilde{Q}^{(\pm)} = 1 - |00;\pm\rangle\langle 00;\pm| \quad , \tag{3.7}$$

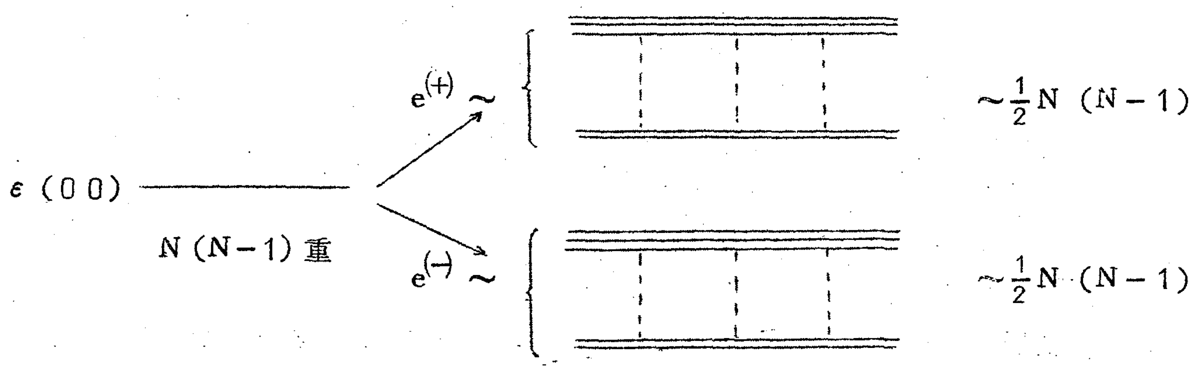
であるとする。このとき，

$$c^{(\pm)}{}_{ij} = \langle 0\vec{R}_i\, 0\vec{R}_j ;\pm | \psi^{(\pm)}\rangle \quad , \tag{3.8}$$

は，次の固有方程式をみたす：

$$\sum_{i'>j'} \Big\{ (e^{(\pm)} - \varepsilon(00))\, \delta_{\vec{R}_i \vec{R}_{i'}}\, \delta_{\vec{R}_j \vec{R}_{j'}} - \widetilde{K}^{(\pm)}(0\vec{R}_{i'}\, 0\vec{R}_{j'} ; 0\vec{R}_i\, 0\vec{R}_j) \Big\}\, c^{(\pm)}{}_{i'j'} = 0 \, . \tag{3.9}$$

2体のエネルギー $e^{(\pm)}$は，この方程式の固有値であり，もしも縮退が完全に解けたとするなら，入れ換え対称性毎に，各$\frac{1}{2}N(N-1)$本のレベルに分かれている（図2）。原子の局在化が



相互作用なし　：　　　　相互作用 v がある時

図 2

良いなら，これらのレベル間の広がりは小さく，しかも異る入れかえ対称のレベルは，互いに混じり合う事はないとして良い。そこで我々は，（3．6）のエネルギー分母における $e^{(\pm)}$ を，これらのレベルの中から，異る入れ換え対称性毎に，各ひとつ，例えば各々の場合の最低エネルギー値，を採って近似し

よう。この時$\widetilde{K}$行列はエルミト的となり，$\widetilde{K}$によるvの展開は，

$$v=\widetilde{K}^{(\pm)}-\widetilde{K}^{(\pm)}\widetilde{G}^{(\pm)}\widetilde{K}^{(\pm)}+O(\widetilde{K}^{3}) , \qquad (3.10)$$

となる。ここに

$$\widetilde{G}^{(\pm)}\equiv(\varepsilon(00)-\bar{H})^{-1}\widetilde{Q}^{(\pm)} . \qquad (3.11)$$

“代表的”エネルギーレベル$e^{(\pm)}$の，縮退エネルギー$\varepsilon(00)$からのずれは$O(\widetilde{K})$であり，その影響は，vの展開では$O(\widetilde{K}^{3})$からしかあらわれて来ない事に注意しよう。

次に我々は外場Uのセルフコンシステントな表現を与え，ハミルトニアン$\mathcal{H}''$の基底エネルギーをKで展開しよう―

a）原子スピン0の場合（^4He）：

外場Uを

$$U_i(n;m)=\sum_{j(\neq i)}\widetilde{K}^{(+)}(n\vec{R}_i 0\vec{R}_j ; m\vec{R}_i 0\vec{R}_j) ,$$
(3.12)

及び

$$U(n\vec{R}_j ; m\vec{R}_i)=\sum_{j'(\neq i,j)}\widetilde{K}^{(+)}(n\vec{R}_j 0\vec{R}_{j'} ; m\vec{R}_i 0\vec{R}_{j'}),$$
(3.13)

で与える。無摂動ハミルトニアン$\mathcal{H}_0^{(a)}$の基底状態（2.29）から出発すれば，$\mathcal{H}'''$の基底エネルギーE'''は，$\widetilde{K}$の1次で，

$$E'''-\varepsilon_0\cong-(1/2)\sum_{i\neq j}K^{(+)}_{ij}(00;00) , \qquad (3.14)$$

となる。格子点移動項$\mathcal{H}_I^{(b)}$の寄与が消えるのは，基底状態Φ_0が，“完全結晶”である為である。“不完全結晶”の中間状態を許せば，高次項に$\mathcal{H}_I^{(b)}$の寄与があらわれ得る。この際，ランダムフエイズ近似に対応する消し合いがある事に注意しよう：実際（3.10），（3.13）より

$$\mathcal{H}_I^{(b)} \approx -\sum_{i\neq j}\sum_{mn} U(n\vec{R}_j;m\vec{R}_i)\, b^+(n\vec{R}_j)\, b(m\vec{R}_i)$$

$$+(1/2)\sum_{(i,j)\neq(i',j')}\sum_{m_1m_2n_1n_2} v(n_1\vec{R}_{i'}n_2\vec{R}_{j'};m_1\vec{R}_im_2\vec{R}_j)$$

$$\times\{b(n_1\vec{R}_{i'})^+b(m_1\vec{R}_i)\langle\Phi_0|b(n_2\vec{R}_{j'})^+b(m_2\vec{R}_j)|\Phi_0\rangle$$

$$+b(n_1\vec{R}_{i'})^+b(m_2\vec{R}_j)\langle\Phi_0|b(n_2\vec{R}_{j'})^+b(m_1\vec{R}_i)|\Phi_0\rangle$$

$$+b(n_2\vec{R}_{j'})^+b(m_1\vec{R}_i)\langle\Phi_0|b(n_1\vec{R}_{i'})^+b(m_2\vec{R}_j)|\Phi_0\rangle$$

$$+b(n_2\vec{R}_{j'})^+b(m_2\vec{R}_j)\langle\Phi_0|b(n_1\vec{R}_{i'})^+b(m_1\vec{R}_i)|\Phi_0\rangle\}$$

$$\approx 0+O(\tilde{K}^2)\quad. \tag{3.15}$$

b）原子スピン1／2の場合（^3H_e）：
外場は次の通りである

$$U_i(n\mu';m\mu)=\delta_{\mu\mu'}\sum_{j(\neq i)}(\tilde{K}^{(+)}_{ij}(n0;m0)+3\tilde{K}^{(-)}_{ij}(n0;m0))/4, \tag{3.16}$$

及び

$$U(n\mu'\vec{R}_j;m\mu\vec{R}_i)=\delta_{\mu\mu'}\sum_{j'(\neq i,j)}(1/4)\{\tilde{K}^{(+)}(n\vec{R}_j0\vec{R}_{j'};m\vec{R}_i0\vec{R}_{j'})$$

$$+3\tilde{K}^{(-)}(n\vec{R}_j0\vec{R}_{j'};m\vec{R}_i0\vec{R}_{j'})\}. \tag{3.17}$$

無摂動状態(2.34)を出発にとって$\mathcal{H}'''$の基底エネルギー$E'''_{\{\mu\}}$を，$\widetilde{K}$で展開する事はたやすい：実際，$O(\widetilde{K})$で次を得る：

$$E'''_{\{\mu\}} - \varepsilon_0 \cong \widetilde{E}^{(1)}_{\{\mu\}} , \qquad (3.18)$$

ここに，$\widetilde{E}^{(1)}_{\{\mu\}}$は，前章のb)における$E^{(1)}_{\{\mu\}}$の様なベクトル型に書かれ，後者の$K^{(\pm)}$による表現を，そのまま$\widetilde{K}^{(\pm)}$に置き換えたものである。
特に交換積分$\widetilde{J}^{(1)}_{ij}$は

$$\widetilde{J}^{(1)}_{ij} = \widetilde{K}^{(+)}_{ij}(00;00) - \widetilde{K}^{(-)}_{ij}(00;00), \qquad (3.19)$$

となる。原子スピン1／2の場合にも，スピン0の場合に述べた，格子点移動項$\overset{(b)}{I}$に対する注意がそのまま云える事を付記して置く。

§4. 簡単な議論

統計を考慮した場合の量子固体の凝集エネルギーを求めるセルフコンシステントな定式化を与え，特に^3Heに対する交換積分の表現を与えた。局在化が良く，交換のみ可能な場合と，格子点移動もあり得るとした場合との両方の定式化を述べ，更に前者には，2通りの方法を示した。

交換力の問題だけでなく，凝集エネルギー[2),3)]，音波の問題[1)]を取扱う際にも，常に我々の理論の鍵をなしているのは，2体方程式を如何に良い近似で，セルフコンシステンシイを保ちながら，解くかである。極く初歩的な近似に基いた凝集エネルギー値の計算がIN－1に実行されており，満足すべき結果を与えた。更に進んだ計算を行い，入れかえ対称性や，第3章に注意した縮退を正しく処理して，凝集エネルギーの詳しい計算，音波の分散関係及び交換積分の計算を実行する事により，我々の理論が量子固体の統一的な記述の基礎となり得るかが判定されよう。

尚，交換積分についてIN－1の結果から言える事をあげよう。そこでの計算により固体ヘリウムの1原子波動函数の広がりが，モル体積と伴に，ほぼ線型的に減少する事を見た(IN－1の図1を見よ)。これは，ハードコア効果の反映にほかならないが，更に，交換積分に対して，それが，圧力を増した時，

単純な予想とは違つてむしろ減少する事を予測させる。この事は実験的にも確かめられている。

終りに，この稿及び前稿のまとめ迄に，東大教養物理の岩本文明氏が与えて下さった，数多くの御教示とシッタゲキレイに感謝したい。特に交換積分に対する最後のコメントは岩本氏に依る。

参 考 文 献

1) 生井沢 寛，“量子固体の動的記述Ⅰ－フォノン”，物性研究 16，№3 401(1971)．以下にⅠと参照．

2) F. Iwamoto and H. Namaizawa, Suppl. Prog. Theor. Phys. 37/38 234(1966)．以下にIN－1と参照．

3) F. Iwamoto and H. Namaizawa, Prog. Theor. Phys. 45, 682(1971)．以下にIN－2と参照．

4) 固体ヘリウムに関する実験・理論の最近のレビューとしては，R. A. Guyer, Solid State Phys. 23, 413(1969)，を見よ。